Computerphysik WS 2015/2016

Prof. Dr. Roland Netz, FU Berlin

Übungsblatt 12: Zufallszahlen und Monte-Carlo-Integration

Alexander Schlaich, Johann Hansing

14. Januar 2016

Allgemeine Hinweise

Abgabetermin für die Lösungen ist

- **Sonntag, 24.01.2014, 24:00 Uhr.**

12.1 Zufallszahlen (6 Punkte)

12.1.1 (3 Punkte)

Implementieren Sie den in der Vorlesung vorgestellten linearen kongruenten Zufallszahlengenerator mit der Iterationsvorschrift:

$$n_{i+1} = (a \cdot n_i + b)\, mod\, c. \tag{1}$$

Der Modulo-Operator wird in Python als % geschrieben und kann sowohl für Ganzzahlen als auch für Gleitkommazahlen verwendet werden.

Leiten Sie den Startwert (*seed*) n_0 von der Systemzeit t (`time.time()`) wie folgt her:

$$int\left(\frac{abs((64979 \cdot t \cdot (pid - 83))mod\, 104729)}{104729} \cdot c\right) \tag{2}$$

Hierbei ist pid die Process ID der laufenden Anwendung (`os.getpid()`). Nutzen Sie die *magic numbers* $a = 7^5$, $b = 0$ und $c = (2^{31} - 1)$.

12.1.2 (2 Punkte)

Generieren Sie eine Folge von $N = 10.000$ Zufallszahlen $r_1, \ldots, r_N$ im Bereich [0,1) mit der Vorschrift $r_i = n_i/c$. Berechnen Sie das arithmetische Mittel $\bar{r} = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} r_i$ (`np.mean()`) sowie die Standardabweichung

$$\sigma_r = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(r_i - \bar{r})^2} \tag{3}$$

(`np.std()`) dieser Zufallszahlen. Plotten Sie die Verteilung der Zufallszahlen in einem Histogramm.

12.1.3 (1 Punkte)

Berechnen Sie für $N = 100, 200, \ldots, 10000$ das arithmetische Mittel, sowie die Standardabweichung. Stellen Sie die beiden Werte als Funktion von N dar. Erläutern Sie Ihre Beobachtungen.

12.2 Monte-Carlo-Integration (8 Punkte)

Bei der Stützstellen Monte Carlo Integration ergibt sich ein Schätzwert für das gesuchte Integral durch Auswertung des Integranden an N zufällig ausgewählten Stützstellen:

$$I_{MC} := \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^{N} f(a+(b-a)r_i) \approx \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x, \tag{4}$$

wobei $(r_1,...,r_N)$ unabhängige, zwischen 0 und 1 gleichverteilte, Zufallszahlen sind.

Wir wollen diese Methoden nun mit der Rechteck- oder Mittelpunktsmethode,

$$I_M := \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^{N} f(a+(b-a)(i-0{,}5)/N) \approx \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x, \tag{5}$$

vergleichen.

12.2.1 (4 Punkte)

Implementieren Sie die beiden Integrationsmethoden allgemein. Ihre Funktionen sollten die zu integrierende Funktion f, die Intervallgrenzen a, b, sowie die Anzahl Stützstellen/Stichproben N als Argumente haben.

Hinweis: Zum Erzeugen von Zufallszahlen können Sie entweder ihren Generator aus Aufgabe 1 oder Funktionen aus der Klasse `numpy.random` verwenden.

12.2.2 (4 Punkte)

Berechnen Sie das Integral

$$\int_0^1 \exp(-x^2)\ \mathrm{d}x = \frac{1}{2}\sqrt{\pi}\,\mathrm{erf}(1) \tag{6}$$

mit den beiden Methoden für jeweils

$$N = 2^1, 2^2, ..., 2^{18}. \tag{7}$$

Stellen Sie die jeweiligen absoluten Abweichung vom analytischen Ergebnis als Funktion von N in einem gemeinsamen doppellogarithmischen Plot dar.

Plotten Sie zusätzlich die Potenzgesetze $N^{-1/2}$, N^{-2}, um das Skalierungsverhalten der absoluten Abweichungen zu illustrieren.

Hinweis: Die Potenzgesetze müssen nicht an die Daten gefittet werden. Sie sollten aber schreiben, welches Potenzgesetz zu welcher Methode passt.

12.3 Mehrdimensionale Monte-Carlo (6 Punkte)

Man kann Gleichung 4 leicht erweitern um mehrdimensionale Integrale zu lösen. Für ein Integral in zwei Dimensionen ergibt sich zum Beispiel

$$\int_a^b \int_c^d f(x,y)\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y \approx \frac{(b-a)(d-c)}{N} \sum_{i=1}^{N} f(\tilde{x}_i,\tilde{y}_i)\ . \tag{8}$$

Hier ist $\tilde{x}_i = a+(b-a)r_i$ und $\tilde{y}_i = c+(d-c)\rho_i$, wobei $(r_1,...,r_N)$ und $(\rho_1,...,\rho_N)$ zwischen 0 und 1 gleichverteilte, Zufallszahlen sind.

12.3.2 (2 Punkte)

Lösen Sie mit Hilfe der mehrdimensionalen Stützstellen Monte Carlo Integration das Integral

$$I = \int_0^1 dx_1 \int_0^1 dx_2 \dots \int_0^1 dx_{10} (x_1 + x_2 + \cdots + x_{10})^2 = \frac{155}{6} \; . \tag{9}$$

und überprüfen Sie ihre Resultat durch Vergleich mit dem analytischen Ergebnis.

12.3.2 (2 Punkte)

Berechnen Sie das 10-dimensionale Integral I mit $N = 10^n$ Stützstellen, für $n = 1, \dots, 6$. Plotten Sie das Ergebnis der Integration über N in einem halblogarithmischen Plot.

12.3.3 (2 Punkte)

Berechnen Sie die Abweichung der Monte Carlo Integration vom analytischen Ergebnis von I. Stellen Sie die Abweichung als Funktion von $1/\sqrt{N}$ in einem doppellogarithmischen Plot dar und interpretieren Sie das Resultat.